

ФОРМИРОВАНИЕ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ АТОМАМИ МАРГАНЦА НА МЕДНО-АЗОТНОЙ ПОДЛОЖКЕ

Кашин И.В.^{*}, Мазуренко В.В.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России

Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

^{*}E-mail: kashin.i.v@yandex.ru

Поверхностные наносистемы, представляющие собой несколько атомов, адсорбированных на подложку, являются перспективными кандидатами для использования их в разработке новейших вычислительных устройств и модулей памяти [1]. Для эффективного решения задачи реалистичного моделирования магнитных свойств подобных систем особую важность представляет строгий учет локального кулоновского взаимодействия электронов в адсорбированных атомах.

В данной работе было проведено детальное теоретическое исследование формирования обменного взаимодействия между двумя атомами марганца, адсорбированных на медно-азотную подложку, с учетом статических и динамических электронных корреляций. Для этого была решена двухпримесная модель Андерсона с учетом всех 3d состояний двух атомов Mn, полной матрицы кулоновского взаимодействия 3d электронов, а также взаимодействия рассматриваемого димера с подложкой. Результатом расчетов является величины вкладов в обменное взаимодействие за счет гибридизации различных 3d орбиталей димера. В таблице приведены наиболее значимые вклады.

Гибридизованные 3d орбитали димера Mn	Вклад в обменное взаимодействие, мэВ
$x_y - x_y$	1.48
$3z^2-r^2 - xz; xz - 3z^2-r^2$	1.39
$xz - x^2-y^2; x^2-y^2 - xz$	1.04
$x^2-y^2 - x^2-y^2$	0.52

Экспериментальное значение обменного взаимодействия, равное 6.4 мэВ [2], хорошо согласуется с полученным численно (6.8 мэВ). Данная работа позволила сделать шаг к более глубокому пониманию процесса формирования магнитных взаимодействий в сложных сильно коррелированных поверхностных наносистемах.

Исследования выполнены при поддержке гранта Президента РФ МК-5565.2013.2.

1. C. Joachim, J. K. Gimzewski, A. Aviram, Nature, **408**, 541-548 (2000)
2. C. F. Hirjibehedin, C. P. Lutz, A. J. Heinrich, Science, **312**, 1021 (2006)